

TÍNH TOÁN PHỔ SÓNG ĐIỀU HÒA BẬC CAO CỦA NGUYÊN TỬ HYDRO TRONG TRƯỜNG LASER KẾT HỢP VỚI ĐIỆN TRƯỜNG TĨNH

Nguyễn Thị Hiền¹

Ngày nhận bài: 31/8/2022; Ngày phản biện thông qua: 26/9/2022; Ngày duyệt đăng: 22/10/2022

TÓM TẮT

Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng phương pháp nghiên cứu lý thuyết và mô phỏng bằng phần mềm QPROP 3.0 nhằm nghiên cứu phổ HHG và ảnh hưởng của cường độ điện trường tĩnh lên phổ HHG của nguyên tử hydro trong trường laser kết hợp với điện trường tĩnh. Khảo sát phổ HHG của nguyên tử hydro trong trường laser tuyến tính, chúng tôi thu được kết quả phù hợp với công trình (Tulsky, V & Dieter, B., 2020) và phù hợp với tính toán cổ điển. Ngoài ra, khi cường độ điện trường tĩnh tăng trong quá trình tương tác giữa nguyên tử với điện trường của laser kết hợp với điện trường tĩnh, cường độ HHG ở các bậc lẻ bị giảm, cường độ HHG ở các bậc chẵn tăng lên trong vùng miền phẳng. Điều này hợp lý vì cường độ của điện trường tĩnh tăng dẫn đến phá vỡ tính đối xứng theo thời gian của hệ nguyên tử và laser. Nghiên cứu này góp phần giảm thời gian và tài nguyên tính toán so với bài toán khảo sát phân tử bất đối xứng trong trường laser.

Từ khóa: QPROP 3.0, hydro atom, trường laser kết hợp với điện trường tĩnh, sóng điều hòa bậc cao.

1. MỞ ĐẦU

Khoa học kỹ thuật phát triển, độ dài xung laser ngày càng được rút ngắn đã tạo điều kiện thuận lợi cho việc khám phá cấu trúc động của nguyên tử và phân tử. Độ dài xung laser ngắn nhất được tạo ra bằng thực nghiệm vào năm 2012 (Zhao, K., & et al. 2012) là 67 atto giây ($1as = 10^{-18}s$). Đáng chú ý vào ngày 20 tháng 01 năm 2021, các nhà khoa học đã quan sát động lực học của thời gian hồi phục của điện tử nhanh nhất là dưới 7 femto giây ($1fs = 10^{-15}s$) (Zinchenko K. S., & et al. 2021).

Vì nguồn dữ liệu sóng điều hòa bậc cao (High-order Harmonics Generation - HHG) chứa thông tin cấu trúc phân tử (Shafir, D. & et al. 2012) nên được các nhà khoa học quan tâm nghiên cứu. HHG là quá trình quang phi tuyến xảy ra khi nguyên tử, phân tử được đặt trong điện trường của laser mạnh xung cực ngắn và phát ra các photon năng lượng cao từ vùng tử ngoại (Extreme ultraviolet – XUV, 10 nm - 380 nm) đến vùng tia X mềm (0,01 nm - 10 nm). Hiệu ứng này xảy ra trong quá trình tái va chạm của electron và ion mẹ, vì vậy HHG mang thông tin cấu trúc và có độ phân giải thời gian rất ngắn (Corkum P. B., & et al. 1993). Do đó, HHG được sử dụng để theo dõi đồng thời những quá trình động học có độ phân giải không gian dưới Ångström và độ phân giải thời gian vài femto giây (Itatani, J., & et al. 2004, Wolter, B., & et al. 2016). Đặc biệt, HHG là cơ chế cho phép tạo ra các xung atto giây được sử dụng để nghiên cứu bản chất của các quá trình lượng tử (Krausz, F & Ivanov, M. 2009). Vì vậy, việc đưa ra công cụ tính toán phổ HHG của hệ nguyên tử, phân tử được các nhà

khoa học quan tâm. Hiện nay, phần mềm QPROP là một trong các công cụ để tính toán phổ HHG có rất nhiều ưu điểm đã được nhóm nghiên cứu của Giáo sư Dieter Bauer tạo ra (Bauer, D & Koval, D. 2006), được cải tiến thành QPROP 2.0 (Mosert, V & Bauer, D. 2016) và hoàn thiện thành QPROP 3.0 (Tulsky, V & Dieter, B. 2020).

Khi nguyên tử, phân tử tương tác với laser nhiều chu kỳ, phổ HHG phát ra có tần số là số nguyên lần của tần số laser chiếu vào; số nguyên này được gọi là bậc của HHG (Lein, M., & et al. 2002). Trường hợp laser tương tác với các nguyên tử, phân tử đối xứng, phổ HHG chỉ phát ra bậc lẻ do sự đối xứng theo thời gian của nguyên tử, phân tử với laser (Bavli, R & Metiu, H., 1993). Trong khi đó, phổ HHG của các phân tử phân tử bất đối xứng chứa cả bậc chẵn và bậc lẻ (Chen, Y. J., & et al. 2013). Sự khác biệt của phân tử đối xứng và bất đối xứng là ở đại lượng mô men lưỡng cực vĩnh viễn (permanent dipole moment). Ở đây, mô men lưỡng cực vĩnh viễn là đại lượng thể hiện mức độ bất đối xứng của nguyên tử và phụ thuộc vào sự phân bố điện tích của hệ nguyên tử, phân tử (Frumker, E., & et al. 2012).

Khi nguyên tử được đặt trong trường laser kết hợp với điện trường tĩnh, điện trường sẽ phá vỡ tính đối xứng của nguyên tử. Hay nói cách khác, điện trường tĩnh ảnh hưởng đến sự phân bố điện tích của hệ nguyên tử dẫn đến phổ HHG của nguyên tử trong điện trường tĩnh sẽ chứa cả bậc chẵn và bậc lẻ. Tuy nhiên, sự tương quan giữa bậc chẵn, bậc lẻ của phổ HHG với cường độ điện trường tĩnh của nguyên tử hydro dưới tác dụng của

¹Khoa Khoa học Tự Nhiên và Công nghệ, trường Đại học Tây Nguyên;

Tác giả liên hệ: Nguyễn Thị Hiền; ĐT: 0977932991; Email: nhtien@ttn.edu.vn.